

АНИЗОТРОПИЯ НАМАГНИЧЕННОСТИ ИОНОВ ЖЕЛЕЗА В $\text{Er}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$

© А.Н.Пирогов, В.И.Воронин, Н.В.Кудреватых, А.В.Зинин

Институт физики металлов Уральского отделения

Российской академии наук,

620219 Екатеринбург, Россия

(Поступила в Редакцию 8 января 1996 г.)

Исследуется анизотропия намагниченности $\text{Er}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$.

Для выяснения роли магнитной анизотропии (МА) в формировании магнитного момента кристалла представляют большой интерес исследования зависимости величины намагниченности от ее ориентации относительно кристаллографических осей. Согласно [1,2], анизотропия намагниченности $\Delta\mu$ тем больше, чем больше отношение энергии МА к обменной энергии. Значительная для ионов 3d-переходных металлов величина $\Delta\mu \sim 0.1\mu_B$ была обнаружена в редкоземельных высокоанизотропных соединениях RCO_5 , R_2Fe_{17} [2–4]. Еще большую величину $\Delta\mu$ можно ожидать в нитридах $\text{R}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$, так как отношение энергии МА к обменной энергии в них выше, чем в исходных соединениях R_2Fe_{17} [5].

В настоящей работе впервые проведено нейtronографическое исследование анизотропии намагниченности в нитридах $\text{R}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$. В качестве объекта исследования выбран нитрид $\text{Er}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$. В этом соединении изменение ориентации магнитных моментов происходит спонтанно при изменении температуры [5,6], что позволяет изучать явление анизотропии намагниченности без применения внешнего магнитного поля, т. е. в «чистом» виде. Следует отметить, что исследование нитридов $\text{R}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$ имеет и самостоятельный интерес, поскольку они рассматриваются в настоящее время как новые перспективные материалы для постоянных магнитов [5].

Исходный образец $\text{Er}_2\text{Fe}_{17}$ был выплавлен в индукционной печи в гелиевой атмосфере и отожжен при 1220 К. Нитрирование поликристаллического образца проводилось при 770 К в течение 2 h. Нейtronографические измерения выполнены на двух дифрактометрах реактора ИВВ-2М, имеющих длины волн нейтронов 2.42 и 1.515 Å. При анализе нейtronограмм использовалась программа «Fullprof» [7].

Параметры кристаллической структуры и состав исследуемого нитрида были определены из нейtronограммы при 700 К, соответствующей парамагнитному состоянию нитрида. Экспериментальная и расчетная нейtronограммы приведены на рис. 1. При расчете получено, что нитрид имеет состав $\text{Er}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_{2.18}$, гексагональную структуру типа

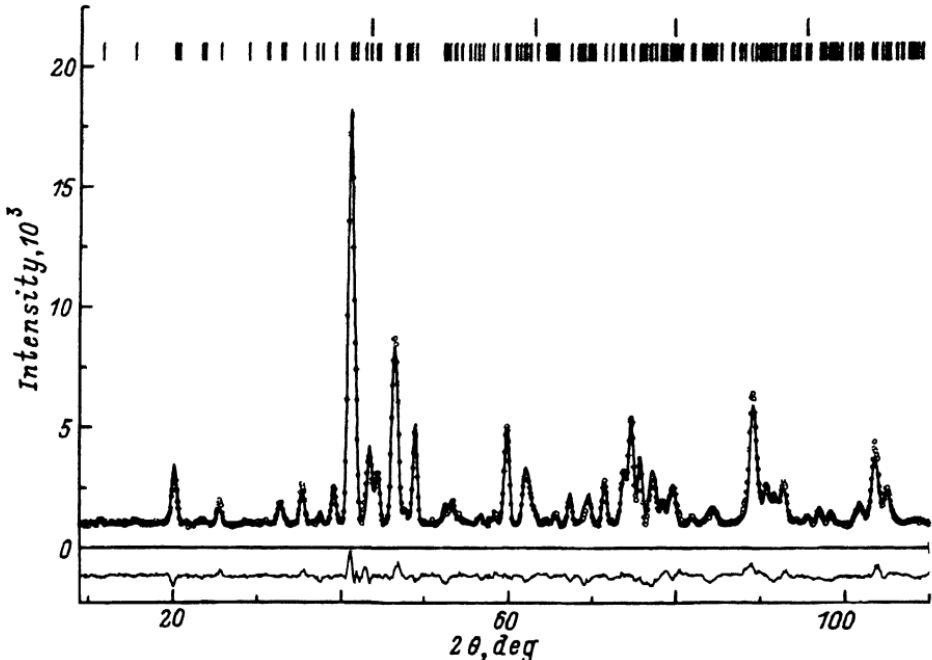


Рис. 1. Нейтронограмма ($\lambda = 1.515 \text{ \AA}$) нитрида $\text{Er}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_{2.18}$ при 700 К.
Точки — эксперимент, линии — расчет, внизу — разность, штрихи — hkl . Второй фазой является α -железо.

$\text{Th}_2\text{Ni}_{17}$ с параметрами решетки $a = 8.6226(7) \text{ \AA}$, $c = 8.4886(8) \text{ \AA}$. Значения координат атомов (см. таблицу) близки к значениям в $\text{Y}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_{25}$ [8] и использовались при анализе нейтронограмм, полученных при 4.2 и 300 К (рис. 2).

В соответствии с [5,6] можно было ожидать, что при этих температурах ось легкого намагничивания в $\text{Er}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_{2.18}$ имеет различные ориентации относительно гексагональной оси. Действительно, из анализа нейтронограмм следует, что при температуре 4.2 К магнитные моменты Er - и Fe -ионов параллельны оси c , а при 300 К перпендикулярны ей с сохранением ферримагнитного упорядочения. Установленные

Координаты и магнитные моменты Er - и Fe -ионов в $\text{Er}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_{2.18}$

Тип иона	Позиция	Координаты	Намагченность, μ_B	
			$T = 4.2 \text{ K}$	$T = 300 \text{ K}$
Er	$2b$		6.7 ± 0.2	2.3 ± 0.2
Er	$2d$		8.7 ± 0.1	2.8 ± 0.2
Fe	$4f$	$z = 0.1124(9)$	2.2 ± 0.2	3.2 ± 0.3
Fe	$6g$		1.9 ± 0.2	1.8 ± 0.3
Fe	$12j$	$x = 0.3291(7)$ $y = -0.0493(5)$	2.7 ± 0.2	2.3 ± 0.3
Fe	$12k$	$x = 0.1659(7)$ $z = -0.0190(4)$	2.3 ± 0.2	2.7 ± 0.3
N	$6h$	$x = 0.1620(8)$	—	—

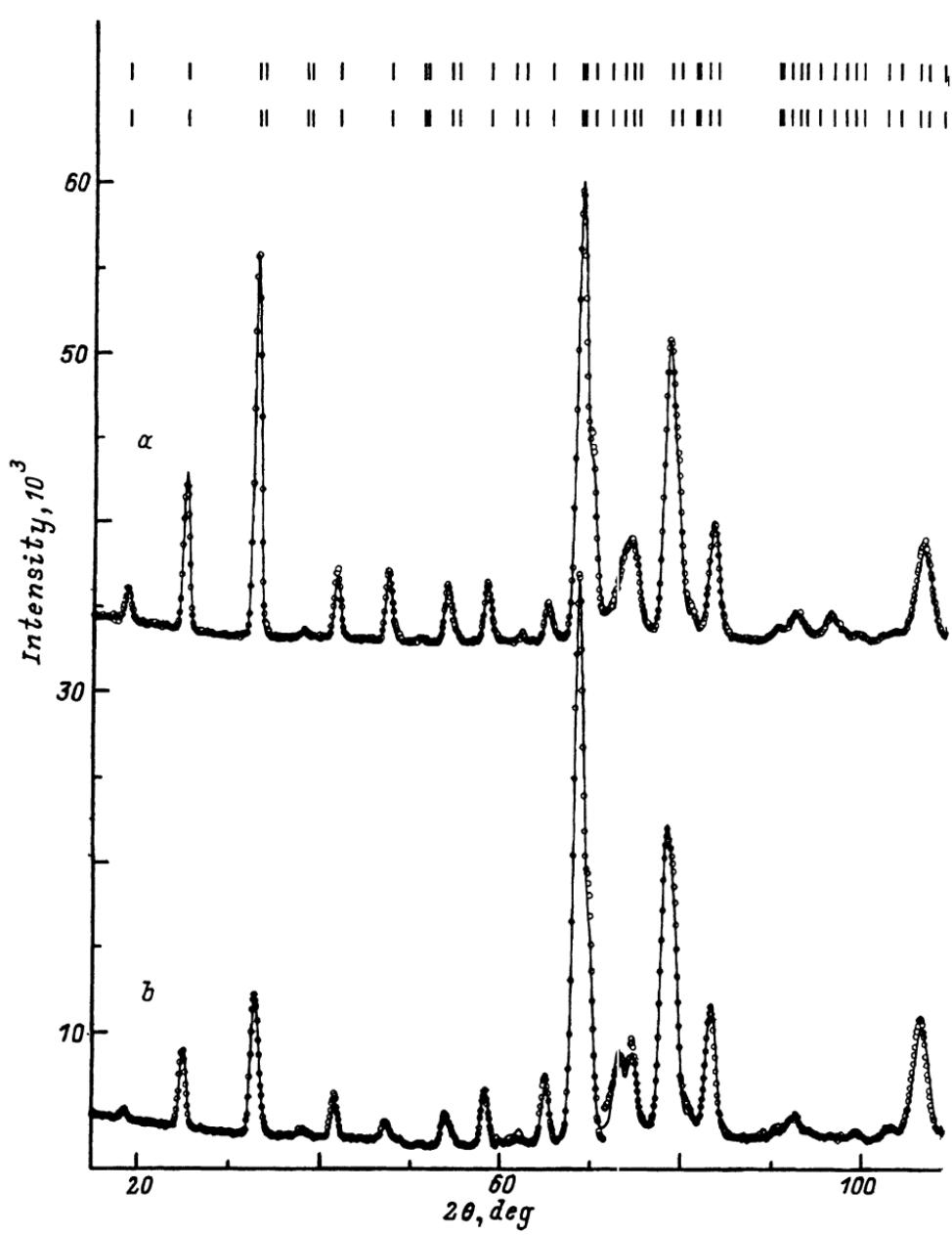


Рис. 2. Нейтронограмма ($\lambda = 2.42 \text{ \AA}$) нитрида $\text{Er}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_{218}$ при 4.2 (a) и 300 К (b). Точки — эксперимент, линии — расчет, штрихи — hkl . Фактор сходимости для магнитной части составляет 4.8% при 4.2 К и 6.2% при 300 К.

величины намагниченностей каждой из Er- и Fe-подрешеток представлены в таблице. Видно, что намагниченность Er-подрешеток значительно падает с повышением температуры от 4.2 до 300 К. В пределах экспериментальной погрешности можно считать, что намагниченность подрешеток, образованных Fe-ионами в позициях $6h$, $12j$ и $12k$, не изменяется.

Аномальное поведение проявляет намагниченность подрешетки Fe-ионов в $4f$ -позициях. Ее величина при 300 К выше, чем при 4.2 К, по крайней мере на $\Delta\mu \sim 0.5\mu_B$. Поскольку при 4.2 К магнитные моменты параллельны оси c , а при 300 К перпендикулярны ей, можно сделать вывод о том, что изменение величины намагниченности обусловлено изменением ориентации магнитных моментов. Следовательно, в нитриде $\text{Er}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$ намагниченность $4f$ -подрешетки железа обладает большой анизотропией ($\Delta\mu \sim 0.5\mu_B$), превосходящей известные значения $\Delta\mu$ в высокоанизотропных магнетиках.

Как теоретически показано в [2], анизотропия намагниченности атомов $3d$ -переходных металлов имеет конечное значение при 0 К и обусловлена в основном зависимостью абсолютных величин спинового и орбитального моментов от их ориентации относительно кристаллографических осей. По-видимому, это относится и к нашему случаю. Такое предположение согласуется с результатами мессбауровских экспериментов на нитриде $\text{Er}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$ [6], в которых наблюдалось уменьшение эффективного поля на ядрах железа с повышением температуры в области спиновой переориентации.

Большая величина анизотропии намагниченности $4f$ -подрешетки свидетельствует о том, что для этой подрешетки отношение энергии МА к обменной энергии выше, чем для трех других ($6h$ -, $12j$ -, $12k$ -подрешеток). А значит, высокая МА Fe-подсистемы в нитридах $\text{R}_2\text{Fe}_{17}\text{N}_x$ обусловлена в основном ионами железа, занимающими позиции $4f$ (гантельки).

Работа выполнена при финансовой поддержке МНТП (грант № 94205 и 94401).

Список литературы

- [1] E.R. Callen, H.B. Callen. J. Phys. Chem. Sol. **16**, 310 (1960).
- [2] Е.В. Розенфельд, А.В. Королев. ФТТ **37**, 6, 1666 (1995).
- [3] J.M. Alameda, D. Givord, R. Lemaire, Q. Lu. J. Appl. Phys. **52**, 2079 (1981).
- [4] J. Deportes., B. Kebe, R. Lemaire. J. Magn. Mat. **54-57**, 1089 (1986).
- [5] J.P. Liu, K. Barker, F.R. de Boer. J. Less-Com. Met. **170**, 109 (1991).
- [6] P.C.M. Gubbens, A.A. Moolenaar, G.J. Boender, A.M. Kraan, T.H. Jacobs, K.H.J. Buschow. J. Magn. Mat. **97**, 69 (1991).
- [7] J. Rodrigues-Carvajal. Physica **B 192**, 55 (1993).
- [8] Y. Yang, X. Zhang, L. Kong, Q. Pan, J. Yang, Y. Ding, B. Zhang, L. Jin. J. Appl. Phys. **70**, 6018 (1991).